

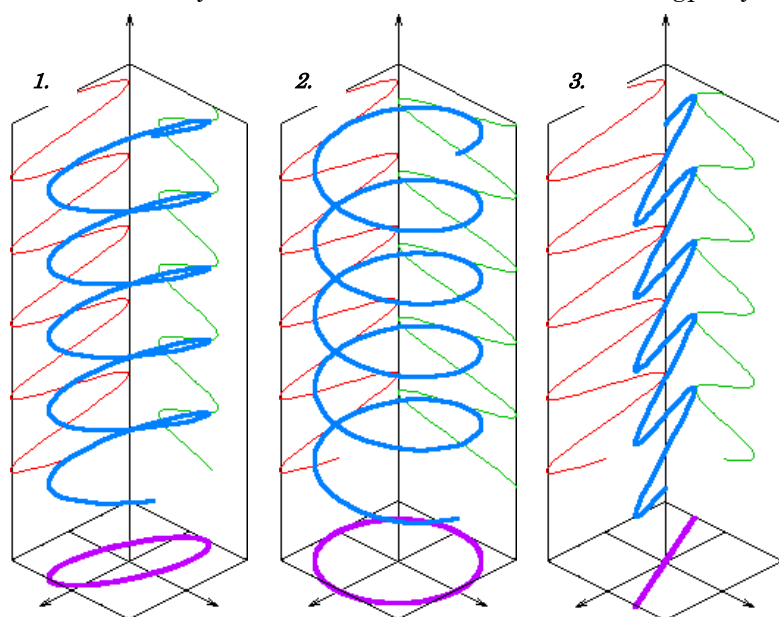
# Mérés spektroszkópai ellipszométerrel

## Bevezetés

Az ellipszometria egy igen sokoldalú, nagy pontosságú optikai módszer vékonyrétegek dielektromos tulajdonságainak meghatározására. Mivel optikai módszer, ezért nem destruktív és érintésmentes, ami többek között in-situ mérést is lehetővé tesz. Alapvetően a mintáról visszaverődött fény *polarizációjának* megváltozását vizsgálja, ami egyrészt a vizsgált fény hullámhosszánaál kisebb vastagságú rétegek analízisét is lehetővé teszi, másrészt nincs szükség a reflektált fény abszolút intenzitásának ismeretére. Spektroszkópai ellipszometria esetén több különböző hullámhossznál vizsgáljuk a polarizáció megváltozását, így a hullámhosszfüggő *dielektromos függvény* meghatározása válik lehetővé.

## Polarizáció

A polarizáció a hullám egy tulajdonsága, mely a rezgés orientációját írja le. Transzverz elektromos hullám esetén ez a terjedési irányára merőleges síkban oszcilláló elektromos vektor mozgásának leírását jelenti. Általános esetben a vektor végpontja a rezgési síkban egy ellipszist ír le



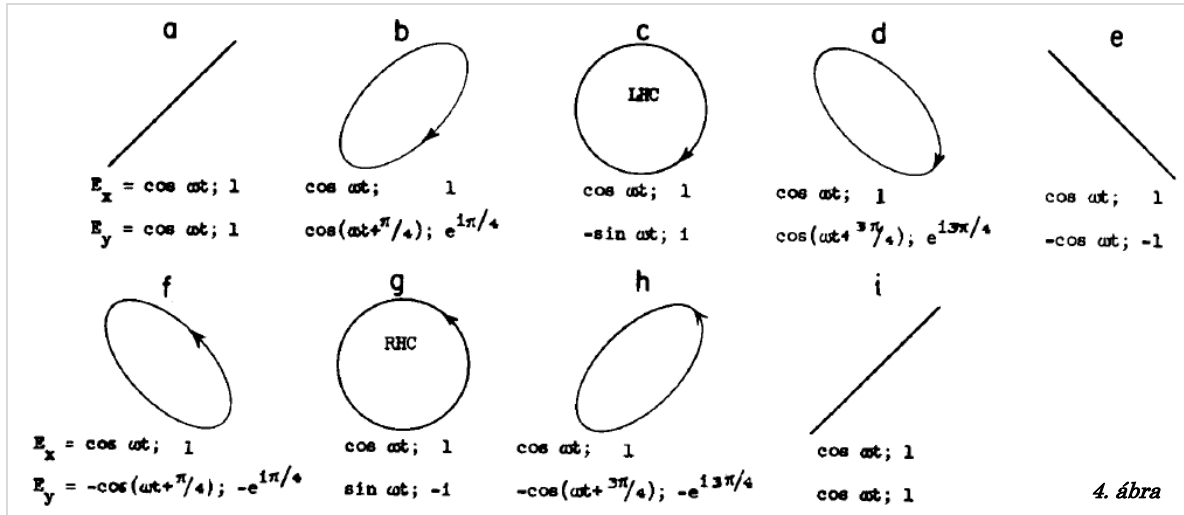
(innen a módszer neve), mely két merőleges szinuszos komponensre bontható (x és y) az 1. ábrán látható módon. Ha a két komponens fázisa  $90^\circ$ -ban tér el egymástól, cirkulárisan polarizált fényt kapunk (2. ábra). Ha a fázisok megegyeznek, akkor összegük lineárisan polarizált lesz (vagyis az elektromos térerősségvektor egy egyenes mentén oszcillál – 3. ábra).

Polarizálatlan viszont a fény, ha az x és y irány közötti fáziskülönbség nem állandó. Ebben az esetben az elektromos vektor polarizációja folyton változik. Mivel egy atom  $\sim 10^{-8}$  sec alatt bocsát ki egy foton, a polarizáció ilyen időköz-

önként változhat. Ha a polarizáció gyorsabban változik, mint ahogy azt észlelni tudjuk, a fényt polarizálatlannak nevezzük, mert minden olyan effektus, ami a polarizációval áll kapcsolatban, kiátlagolódik. Polarizálatlan fényből polarizált fényt *polarizátorral* állítanak elő.

A polarizációs állapot megadására használják a *Jones-vektort*, mely a tér x és y komponensét tartalmazza:  $(E_{0x}, E_{0y})^T$ . Lineárisan polarizált fényt jelöl pl. az  $(1,0)^T$ ,  $(0,1)^T$ , vagy  $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}^{1/2} (1,1)^T$  vektor. Cirkuláris polarizációjú fény Jones-vektora iránytól függően  $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}^{1/2} (1,i)^T$ , vagy  $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}^{1/2} (1,-i)^T$ . Az egyik polarizációs állapotból a másikba történő transzformációt a *Jones-mátrix* írja le. Az  $(1,0)^T$ -ből  $(0,1)^T$ -be történő átmenet pl. a  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  mátrix-szal történő szorzással valósítható meg.

Az következő ábrán azonos amplitúdójú, de különböző fáziskülönbségű x és y irányú rezgések összege látható.



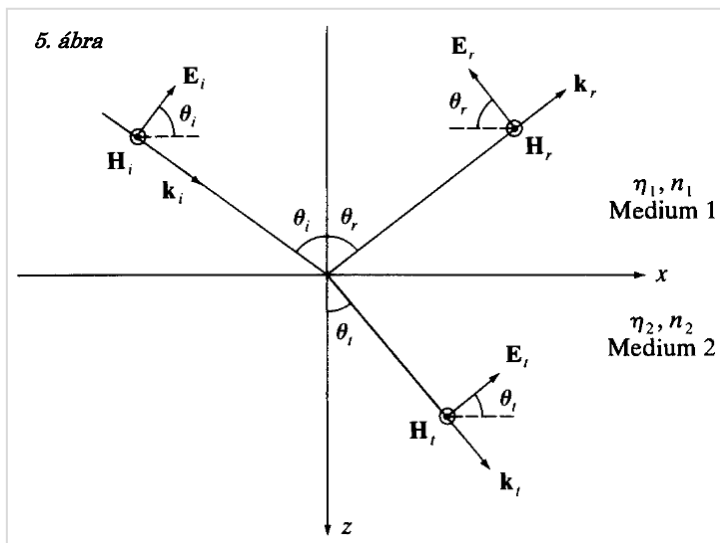
4. ábra

## Polarizált fény törése, visszaverődése

A polarizáció figyelembevételét törésnél és visszaverődésnél két speciális eseten keresztül szemlélítjük, ahol két félvégtelen,  $n_1$  és  $n_2$  törésmutatóval jellemezhető közeg határfelületét vizsgáljuk.

### Párhuzamos polarizáció

Az első esetben mind a beeső, visszaverődő, illetve törő fényre a térerősségvektorok *a beesési síkban vannak*, az ábrának megfelelően (Transzverz Mágneses – TM polarizáció). Mivel a két közeg határfelületén az  $\mathbf{E}$  vektor tangenciális komponense folytonosan megy át, írhatjuk, hogy:



$$(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r)|_{x \text{ irányban}} = \mathbf{E}_t|_{x \text{ irányban}},$$

ami megfelel az

$$E_{i0} \cos(\theta_i) - E_{r0} \cos(\theta_r) = E_{t0} \cos(\theta_t)$$

egyenletnek. A mágneses térerősségvektor ( $\mathbf{H}$ ) tangenciális komponensére is hasonló összefüggés igaz:

$$(\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_r)|_{x \text{ irányban}} = \mathbf{H}_t|_{x \text{ irányban}}$$

A Maxwell-egyenletek síkhullám-megoldásából következik, hogy:

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} = \frac{1}{\omega} \mathbf{k} \times \mathbf{E}.$$

Ennek felhasználásával kapjuk az elektromos térerősségvektorra az újabb egyenletet:

$$E_{i0}n_1 + E_{r0}n_1 = E_{t0}n_2.$$

Az  $E_{i0}$ ,  $E_{r0}$ ,  $E_{t0}$ -ra vonatkozó két egyenletből egyértelműen levezethetők az amplitúdókra vonatkozó *reflexiós és transzmissziós együtthatókat* meghatározó Fresnel-egyenletek:

$$r_{\parallel} = \frac{E_{r0}}{E_{i0}} = \frac{n_2 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_2 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t}$$

$$t_{\parallel} = \frac{E_{t0}}{E_{i0}} = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_2 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t}$$

## Merőleges polarizáció

A beesési síkra merőleges irányú polarizáció esetén (Transzverz Elektromos – TE) hasonló gondolatmenet alapján kapjuk a merőleges polarizációs irányban értelmezett Fresnel-egyenleteket:

$$r_{\perp} = \frac{E_{r0}}{E_{i0}} = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}$$
$$t_{\perp} = \frac{E_{t0}}{E_{i0}} = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}$$

## Brewster-szög

$t_{\parallel}$  és  $t_{\perp}$  kifejezéséből látszik, hogy értékük mindig pozitív, míg a reflexiók együtthatók  $n_1$  és  $n_2$  értékétől függően lehetnek pozitívak vagy negatívak is. Ha pl.  $n_1 > n_2$ , a Snellius-Descartes törvénynek megfelelően  $\theta_i < \theta_t$ , vagyis  $\cos \theta_i > \cos \theta_t$ . Ebben az esetben az  $r_{\perp}$ -re vonatkozó kifejezésből adódóan a visszavert hullám fázisban van a beeső hullámmal ha  $n_1 > n_2$ , míg  $\pi$  fáziskülönbség mérhető közöttük ha  $n_1 < n_2$ . (Hasonló általános megállapítás  $r_{\parallel}$ -ra nem tehető.)

Mivel egy adott határfelületen a beesési szögtől függően  $r_{\perp}$  lehet pozitív illetve negatív is, előállhat az  $r_{\perp} = 0$  eset is, ami az  $n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t = 0$  egyenletet eredményezi. Ebből a Snellius-Descartes törvény felhasználásával a  $\sin(\theta_t - \theta_i) \cdot \cos(\theta_t + \theta_i) = 0$  egyenlet adódik. Mivel  $n_1 \neq n_2$ -re  $\theta_t \neq \theta_i$ , végül a  $\theta_t + \theta_i = \frac{\pi}{2}$  kifejezésre jutunk, ami meghatározza az  $r_{\perp} = 0$  eset feltételét. Ebben az esetben tehát a visszaverődő fény csak TM polarizált komponenszt tartalmaz, TE-t nem.

Brewster-szögnek az  $r_{\perp} = 0$  esethez tartozó beesési szöget nevezzük – értékét a Snellius-Descartes törvényt és a  $\theta_t + \theta_i = \frac{\pi}{2}$  összefüggést felhasználva levezethető  $\theta_p = \arctan\left(\frac{n_2}{n_1}\right)$  kifejezés adja. Értéke víz/levegő határfelület esetén  $52^\circ$ , üveg/levegő határfelület esetén  $56^\circ$ , míg szilícium/levegő határfelület esetén  $75,5^\circ$  körül van.

## Lineárisan poláros fény előállítása

1. A Brewster-szög alatti visszaverődés az egyik módja lehet lineárisan poláros fény előállításának.
2. Egy másik módszer a fényszóródáson (Thomson-szórás) alapul:
  - a. a polarizálatlan fény gázban töltött részecskéket hoz mozgásba, az éppen aktuális polarizáltsági irányban;
  - b. a mozgó töltés fénykibocsátása erre az irányra merőlegesen történik, és ez a fény már lineárisan poláros lesz – polarizáltságának iránya megegyezik a töltés rezgésének irányával.
3. A harmadik módszer a kettőtörő anyagok használata. Kettőtörő anyagoknál a törésmutató különbözik két eltérő irányban lineárisan poláros fényre. Az effektus mögött álló fizikai kép szerint nem gömbszimmetrikus molekulákból álló anyagban a molekulák tengelyük (az optikai tengely) mentén könnyebben gerjeszthetők (a tér számára a tengelyükre merőleges irányban nehezebb őket kimozdítani).

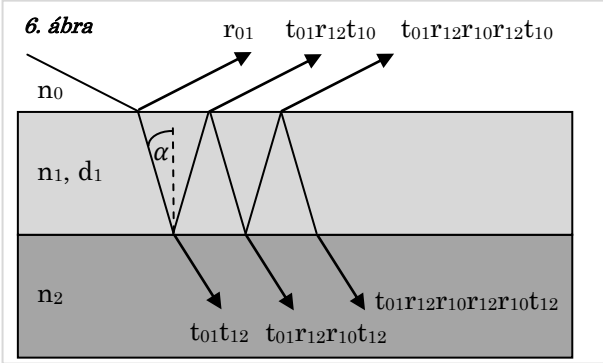
Ha egy ilyen anyagra az optikai tengellyel párhuzamos polarizáltságú lineárisan poláris fény esik (a felületre merőlegesen), a fény egy meghatározott sebességgel halad át az anyagon; ha a tengelyre merőleges lineárisan poláros fény esik, annak egy másik meghatározott sebessége lesz. Azonban pl.  $45^\circ$ -os polarizációnál, a tengelybe, és arra merőleges irányba eső fénykomponens más-más sebességgel halad, és így haladásuk során fázisuk máshogy változik. Ha az anyag vastagsága pont olyan, hogy  $90^\circ$ -os fáziskülönbséget iktasson be a két komponens közé, a kilépő fény cirkulárisan poláros lesz a 4-c. ábrának megfelelően (negyedhullámhosszú lemez). Ha a lineárisan poláros fény egy félhullámhosszú lemezen halad át, a polarizáció szöge  $90^\circ$ -al fordul el a 4-e. ábrának megfelelően. Kettőtörő anyag pl. a kalcit, vagy az egyszerű celofán is.

Amiért lineárisan poláros fény előállítására használhatóak, az az a tény, hogy az optikai tengelyre merőleges, illetve azzal párhuzamos polarizáltság fénykomponens más-más szög

alatt törik a különböző törésmutatók miatt. Az optikai tengely irányával párhuzamosan terjedő fényre vonatkozó törésmutatót ordinárius, az arra merőleges törésmutatót extraordinárius törésmutatónak nevezik. (A Snellius-Descartes törvényt csak az ordinárius sugár teljesíti.) Érdeemes megemlíteni a *Nicol-prizmát*, mely két, összeérintett kalcitkristályból áll, és a két megtört sugárból az egyiket teljes visszaverődéssel eltávolítja.

## Vékonyrétegek vizsgálata polarizált fénnel

Ellipszometriai mérésel leggyakrabban szubsztrát felületén elhelyezkedő vékonyréteg film vastagságát, illetve dielektromos tulajdonságait határozzák meg. Ebben az esetben a visszavert fényre vonatkozó reflexiók együttható a 6. ábrának megfelelően, végtelen sorfejtés eredményeként áll elő:



áll elő:

$$r_{tot} = r_{01} + t_{01}r_{12}t_{10}e^{-2i\beta} + t_{01}r_{12}^2r_{10}t_{10}e^{-4i\beta} + \dots$$

ahol  $\beta = 2\pi \frac{d_1}{\lambda} n_1 \cos \alpha$ . A kifejezésben szereplő összes  $r$  és  $t$  együtthatónak létezik a beesési síkba eső és arra merőleges komponense.

Felhasználva, hogy  $r_{01} = -r_{10}$  és  $t_{10}t_{01} = 1 - r_{01}^2$ :

$$r_{tot} = \frac{r_{01} + r_{12}e^{-i2\beta}}{1 + r_{01}r_{12}e^{-i2\beta}}$$

A visszaverődött teljes térerősség:

$$E_{r\ total} = r_{tot} \cdot E_{incident}$$

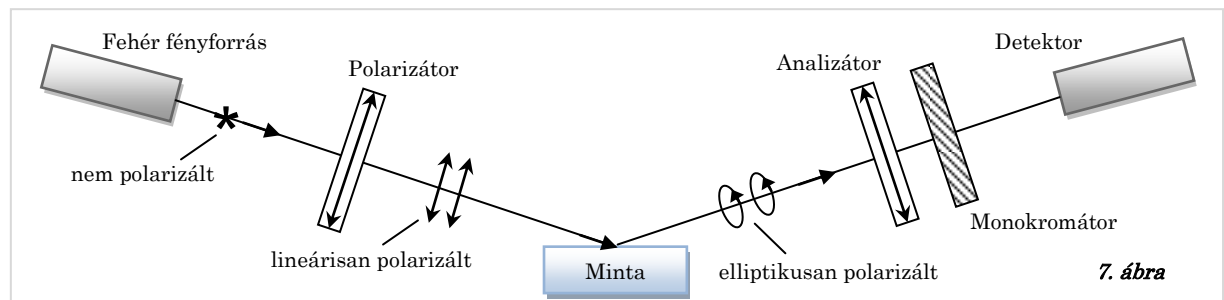
ami p, és s irányú polarizáltságra is értelmezve van. A komplex  $r_{tot}^{\parallel}$  és  $r_{tot}^{\perp}$  hányadosát felírhatjuk úgy is, hogy:

$$\frac{r_{tot}^{\parallel}}{r_{tot}^{\perp}} = \tan \Psi \cdot e^{i\Delta} = \rho$$

vagyis különválasztva a komplex szám amplitúdóját és fázisát. Itt  $\Psi$  és  $\Delta$  az ún. ellipszometriai szögek, fizikai értelmük:  $\tan \Psi = \left| \frac{r_{tot}^{\parallel}}{r_{tot}^{\perp}} \right|$ , és  $\Delta = \theta_r^{\parallel} - \theta_r^{\perp}$  (ez utóbbi a visszavert fény  $\parallel$  és  $\perp$  polarizáltsági irányú komponenseinek fáziskülönbsége).  $\Psi$  és  $\Delta$  is a hullámhossz függvénye.

Mivel  $\beta$  tartalmazza a vékonyréteg vastagságát illetve törésmutatóját,  $\rho$  (komplex „reflektancia”) pedig  $\beta$ -t,  $\rho$  ismeretében a vékonyréteg vastagsága illetve törésmutatója meghatározható lenne, ha  $\rho$  analitikus függvénye lenne  $\beta$ -nak. Mivel nem az, a kívánt paraméterek meghatározása indirekt úton történik.

## Mérés forgó analizátoros spektroszkópiai ellipszométerrel



Forgó analízátoros ellipsztométer esetén egy, a minta utáni fényútba helyezett, folyamatosan forgó polarizátor segítségével (ezt a polarizátort hívják analízátornak) határozzák meg az ún. polarizációs ellipszist (vagyis az elektromos térerősségvektor irányfüggő amplitúdóját), és ebből számolják az ellipszometriai szögeket. Forgó analízátoros *spektroszkópi*ai ellipsztométer esetén széles spektrumú fényforrást használnak a minta megvilágítására, így lehetővé válik az ellipszometriai szögek frekvenciafüggő meghatározása.

A mérés blokkvázlatát a 7. ábra mutatja. Fehér fényforrásból (pl. Xe kisülőlámpa) a polarizálatlan fényt lineáris polarizátoron keresztül vezetjük a mintára. A mintáról visszaverődő fény általános esetben elliptikusan polarizált lesz, mely ellipszis paramétereit egy másik polarizátor, az ún. forgó analízátor, és a detektor segítségével határozzuk meg. Az analízátor után a fényútba diszperzív elemet helyezve (pl. transzmissziós rács), a mintáról visszaverődő fény polarizáltságát több hullámhosszon is mérhetjük. Az egyszerűség kedvéért képzeljük el, hogy a mozdulatlanul álló rács mögött egy vonal mentén több különböző detektor helyezkedik el, melyek egy-egy fix hullámhossznak megfelelő helyen detektálják a fény intenzitását.

Ahogy az analízátorunk forog, időben különböző polarizáltságú irányokban „pásztáz”, és az ellipszisnek, amit „letapogat”, különböző irányú (és így különböző nagyságú) vetületeit engedi át. Emiatt az egyes detektorok kimenetén megjelenő jel az időnek periodikus függvénye (szinuszos) lesz. Az analízátor egy körüljárásával elvileg a polarizációs ellipszis rekonstruálható lenne, de érdemes minél több körüljárást (>100) futtatni, és azok eredményét átlagolni a zaj csökkentése érdekében.

Az egyes detektorok kimenetén megjelenő feszültségjel tehát:

$$U_{det} = 1 + \frac{|\rho|^2 \cos^2 P - \sin^2 P}{|\rho|^2 \cos^2 P + \sin^2 P} \cos 2A + \frac{\operatorname{Re}\{\rho\} \sin 2P}{|\rho|^2 \cos^2 P + \sin^2 P} \sin 2A$$

$$U_{det} = 1 + \alpha(\rho, P) \cos 2A + \beta(\rho, P) \sin 2A$$

ahol  $\alpha$  és  $\beta$  a  $\rho$ -tól és a polarizátor szögállásától ( $P$ ) függő Fourier-együttható, melyek segítségével  $\tan \Psi$  és  $\cos \Delta$  kifejezhető:

$$\tan \Psi = \sqrt{\frac{1+\alpha}{1-\alpha}} \tan P, \quad \cos \Delta = \frac{\beta}{\sqrt{1-\alpha^2}}.$$

A mért detektorjelből tehát így egyértelműen származtatható  $\Psi$  és  $\Delta$ , a mérés célja azonban a vékonyréteg vastagságának és dielektromos függvényének meghatározása.

## Vékonyrétegek vastagságának és dielektromos függvényének meghatározása

Mivel a mért paraméterek ( $\Psi$  és  $\Delta$ ) nem analitikus formában tartalmazzák  $d$ -t és  $n$ -t, az egyenletek nem invertálhatóak. Emiatt indirekt módszert kell használni a kívánt paraméterek meghatározásához. A módszer úgy működik, hogy feltételezünk egy bizonyos rétegvastagságot, illetve törésmutatót, majd egy programmal legeneráltatjuk a hozzájuk tartozó  $\Psi$ -t és  $\Delta$ -t, melyeket egy ilyen mintán mérnénk. A generált és a valóságban mért  $\Psi$ -t és  $\Delta$ -t összehasonlítva addig módosítjuk a modell változóit ( $d$ -t és  $n$ -t), amíg meg nem kapjuk a lehető legjobb egyezést (best fit). Azt, hogy a fit milyen jó, a mért és generált  $\Psi$ -re és  $\Delta$ -ra vonatkoztatott ún. MSE-hibával jellemezhetjük (Mean Square Error). Ha elértük az MSE minimumát, a fit megáll, és a program kiírja a javasolt rétegvastagságot és törésmutatót.

Azonban a törésmutató meghatározása sem teljesen egyértelmű, hiszen azt a hullámhossz függvényében szeretnénk meghatározni. A törésmutató–hullámhossz függvényt különböző modell-függvények segítségével írhatjuk le (parametrikus modellek), de figyelembe vehetünk az irodalomban megadott törésmutató–hullámhossz táblázatokat is.

A legegyszerűbb törésmutató–hullámhossz függvények empirikus formulával írhatóak le, pl. ilyen a Cauchy-formula is:  $n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} + \dots$ , ahol  $A$ ,  $B$  és  $C$  a fit paramétereit gyarapítják. Vegyük figyelembe, hogy gyakorlatilag két független mért paraméterünk van,  $\Psi$  és  $\Delta$ , azonban egy ilyen Cauchy-formulás illesztésnél a fit paraméterek száma már 4 ( $A$ ,  $B$  és  $C$ , plusz a rétegvastagság). Ezt úgy lehet tisztességesen kiküszöbölni, hogy több beesési szögnél végzünk mérést,

így mindig két újabb  $\Psi$  és  $\Delta$  gyarapítja a mért paraméterek sorát (hiszen függenek a beesési szögtől).

Bonyolultabb törésmutató–hullámhossz modelleknél az illesztett paramétereknek lehet konkrét fizikai tartalmuk is, pl. a tiltott sáv szélessége, vagy egyes direkt sávátmenetek erőssége, frekvenciája, vagy kiszélesedése, ami a spektroszkópiai ellipszometriát igen sokoldalú eszközzé teszi a vékonyrétegek optikai függvényeinek meghatározása szempontjából.

Lehetőség van összetétel vizsgálatra is, ha a réteg optikai modelljében több, az irodalomból származó (különböző anyagokhoz tartozó) törésmutatófüggvényt „keverünk össze”. Ez a „keverés” lényegében azt jelenti, hogy speciális, súlyozott átlagolást végzünk, ahol az egyes súlyok az anyagi összetétel százalékos arányainak felelnek meg.

## Ajánlott irodalom

1. Bevezetés a modern optikába, 4. kötet, 9. sz. hallgatói mérés (Vékonyrétegek vastagságának és törésmutatójának meghatározása ellipszométerrel)
2. Bevezetés a modern optikába, 1. kötet, 1.3.5 fejezet (A fény mint vektorhullám) *(kiemelten ajánlott!)*
3. Azzam–Bashara: Ellipsometry and polarized light (North-Holland)
4. Feynman: Lectures on Physics, Vol. 1., Ch. 33. (Polarization) *(kiemelten ajánlott!)*
5. Ábrahám György: Optika, 18–20. fejezet (McGraw Hill)
6. Banerjee, Poon: Principles of applied optics, Ch. 3.2 (Aksen Associates)
7. [http://www.jawoollam.com/tutorial\\_1.html](http://www.jawoollam.com/tutorial_1.html)

## Mérési feladatok

1. Ismerkedjen meg a KFKI 26-os épület 2. emelet, 215-ös laborban található Woollam M2000 spektroszkópiai ellipszométer paramétereivel és kezelésével!
2. Állapítsa meg három különböző vékonyréteg-minta ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{SiO}_2$ , pórusos Si) anyagi összetételét és rétegvastagságát
  - egykomponensű,
  - többkomponensű,
  - illetve parametrikus modell használatával.
3. Teremtsen kapcsolatot az egyik, vékonyréteg-mintán látható interferenciaszínek és a rétegvastagság között!
4. Vegye fel két, különböző méretű szilikagolyókat tartalmazó minta ellipszometriai spektrumát! Próbálkozzon meg a kiértékeléssel és az eredmények magyarázatával!

Budapest, 2010.01.12.

Dr. Basa Péter  
MTA MFA  
70/943-23-87